

Übungen zur Vorlesung Theoretische Chemie I

WS 2018/19 – Übungsblatt 5

Ausgabe: Freitag 16. November, Besprechung: Freitag 23. November

1. Die Schrödingergleichung eines Teilchens in einem zweidimensionalen Kasten lautet

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + V(x, y) \right] \Psi(x, y) = E\Psi(x, y)$$

mit

$$V(x, y) = \begin{cases} 0 & 0 \leq x \leq L_x \wedge 0 \leq y \leq L_y \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$$

- a) Verwenden Sie den Separationsansatz $\Psi(x, y) = \psi_x(x)\psi_y(y)$, um die Eigenfunktionen und -energien des Teilchens im zweidimensionalen Kasten zu bestimmen. Welcher Ausdruck ergibt sich aus dieser Separation für die Gesamtenergie?
- b) Welche Bedingung muss für L_x und L_y gelten, damit die Eigenzustände mit den Quantenzahlen $(n_x = 2, n_y = 2)$ und $(n_x = 4, n_y = 1)$ entartet sind?
2. Die Elektronen des π -Systems linearer Polyene lassen sich in erster Näherung mit dem Teilchen-im-Kasten-Modell beschreiben. Betrachten Sie dazu ein generalisiertes lineares Polyen $\text{CH}_2=\text{CH}(-\text{CH}=\text{CH})_l-\text{CH}=\text{CH}_2$, wobei N die Anzahl der Doppelbindungen im System bezeichnet ($N = l + 2$).
- a) Bestimmen Sie die Länge L des „Kastens“, in den das π -System des Moleküls einbeschrieben werden kann, als Funktion von N . Nehmen Sie dabei an, dass der C-C-C-Bindungswinkel 120° beträgt und dass sowohl die formalen C-C-Einfachbindungen als auch die formalen C=C-Doppelbindungen im π -System dieselbe Länge d haben.
- b) Wie lauten die Energieniveaus des Kastens E als Funktion von N und von der Quantenzahl n ?
- c) Wie viele Elektronen befinden sich im π -System eines linearen Polyens mit N Doppelbindungen? Besetzen Sie die Energieniveaus gemäß dem Pauliprinzip mit dieser Anzahl an Elektronen. Welche Werte nimmt die Quantenzahl n für das höchste besetzte Niveau (HOMO) bzw. das niedrigste unbesetzte Niveau (LUMO) an?
- d) Geben Sie einen Ausdruck für die Energiedifferenz ΔE zwischen HOMO und LUMO an. Wie verhält sich ΔE als Funktion von N ?
- e) Berechnen Sie ΔE explizit für β -Carotin (siehe Abbildung 1 auf Seite 2). Verwenden Sie dabei, dass $d = 140$ pm. Interpretieren Sie dieses Ergebnis als Energie einer optischen Anregung. Welche Wellenlänge haben die entsprechenden Photonen? Welcher Farbe entspricht dies? Vergleichen Sie Ihr Ergebnis mit dem experimentellen Wert.

Fortsetzung auf der nächsten Seite!

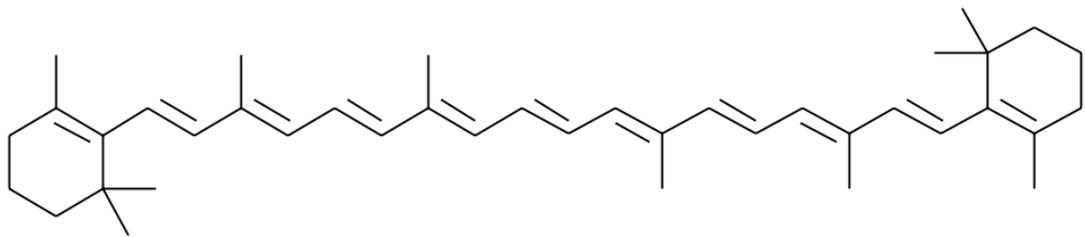


Abbildung 1: Molekülstruktur des β -Carotins.